

Комп'ютерне моделювання хіміко-технологічних та біохімічних процесів і систем

поток рідини, в середньому на 7%. (рис 1.). Максимальна кількість напірних лопатей в пристрої повинна бути 6, тому що при подальшому збільшенні елементів, в прикордонному шарі. Перед отворами витікання спостерігається утворення вихорів (рис. 1г), які створюють додаткові слабкі коливання. При таких умовах спостерігається нерівномірний режим розпилення рідини на мікрокраплі однієї фракції.

В результаті проведення чисельного експерименту було отримано оптимальну кількість лопатей, встановлено залежність швидкості витікання рідини з отворів від кількості напірних лопатей.

Удосконалена конструкція пристрою дозволяє покращити режим його роботи за рахунок:

- утворення додаткового напору рідини перед отворами витікання, робота в більш широкому діапазоні навантажень по рідині та функціонування пристрою без коливань напору;
- зменшенню вірогідності забивання і зміни геометричних розмірів отворів витікання рідини завдяки створенню додаткового тиску перед отворами витікання рідини, збільшення монодисперсності гранул що підвищить якість готової продукції;
- зменшення втрат готової продукції у вигляді пилу, скорочення викидів в атмосферу.

Застосування комп'ютерного моделювання являється одним з ефективних методів відпрацювання нових конструктивних параметрів пристрою. Дозволяє у декілька разів зменшити терміни проектування нової техніки, підібрати оптимальні гідромеханічні показники пристроїв для отримання гранульованого продукту з заданими характеристиками. Намічені шляхи щодо подальшого покращення характеристик пристрою для створення монодисперсних мікрокрапель, які необхідно досліджувати в майбутньому.

1. *Аметистов Е.В.* Монодисперсные системы и технологии [Текст]/ Е.В. Аметистов, А.С. Дмитриев - М.: МЭИ. 2002.- 250 с.
2. *Скиданенко М.С., Склабінський В.І., Артюхов А.С., Іванія А.В.* Визначення впливу фізико-хімічних властивостей середовищ на якість монодисперсних мікрогранул [Текст] / Друга міжнародна наукова конференція студентів, аспірантів та молодих вчених «Хімія та хімічні технології 2011» (ССТ-2011). 24 – 26 листопада 2011. – Львів, 2011. – с. 196 – 197.
3. *Холин Б.Г.* Центробежные и вибрационные грануляторы плавов и распылители жидкости [Текст]/ Б.Г. Холин - М.: Машиностроение. 1977. - 182 с.

АНАЛІЗ ПАРАМЕТРІВ МАТЕМАТИЧНОЇ МОДЕЛІ АДСОРБЦІЇ ТЕТРАФТОРЕТАНУ НА ЦЕОЛІТІ NaY

Кваско М. З., Жураковська О.С., Жураковський Я. Ю.

Національний технічний університет України «КПІ», zhurakovsky@bigmir.net

Вступ. Тетрафторетан (CH_2FCF_3) – (1,1,2,2-тетрафторетан) є хладагентом для холодильників та кондиціонерів. Він був розроблений для заміни хлорфторвуглеводів, таких як діхлордифторметан (Фреон R12), шкідливих для навколишнього середовища. Розв'язання задач пов'язаних із виробництвом, використанням та утилізацією цієї речовини є актуальними для сучасної інженерної науки.

Ізомер HFC-134 (CHF_2CHF_2) (1,1,1,2-тетрафторетан), який не використовується як хладагент, є побічним продуктом виробництва HFC-134a [3]. Вимірювання ізотерм адсорбції HFC-134 і HFC-134a на ряді цеолітів необхідне для дослідження можливого застосування способу розділення цих газів за допомогою адсорбції.

Постановка задачі. У попередній роботі [1] були наведені дані експериментально отриманих ізотерм адсорбції ізомерів тетрафторетану HFC-134a та HFC-134 на цеоліті NaY при різних температурних режимах. Після отримання результатів вимірювань, постає

питання обрання відповідного математичного рівняння, що адекватно описує ці результати. Існує багато моделей різного ступеня складності - від повністю емпіричних до переважно теоретичних. У рамках цієї роботи розглянуто та перевірено відповідність деяких моделей адсорбційних ізотерм результатам практичних вимірів.

Використані моделі. Була розглянута модель Тота (Toth) [2], що описується формулою:

$$n = \frac{n^0 p}{\left(1/K_1^* + p^m\right)^{1/m}}, \quad (1)$$

де $1/K_1^*$ - константа; n^0 - навантаження насичення; m - емпіричний параметр ($0 < m < 1$).

Рівняння Тота було змінено із додаванням можливості підбирати параметри для функції, що описує залежність навантаження насичення від температури:

$$n^0 = n^* \left(1 - \alpha(T - T_{nbp})\right), \quad (2)$$

де T_{nbp} - температура кипіння; α , n^* - емпіричні параметри.

Константа K_1^* була описана функцією

$$K_1^* = \frac{1}{K_b} \exp\left(\frac{U_0}{RT}\right), \quad (3)$$

$$K_b = 2.346\sqrt{MT} \times 10^8, \quad (4)$$

де M - молярна маса; R - універсальна газова константа; U_0 - емпіричний параметр.

Для параметра m використано рівняння

$$m = m_1 - \frac{m_2}{T}, \quad (5)$$

де m_1 , m_2 - емпіричні параметри.

Критерієм підбору параметрів була мінімізація відносного квадратичного відхилення, що розраховане за формулою:

$$\Delta = \frac{(n(i)_{обч} - n(i)_{вим})^2}{n(i)_{вим}^2}, \quad (6)$$

де $n(i)_{обч}$ - кількість адсорбованої речовини, що була розрахована; $n(i)_{вим}$ - кількість адсорбованої речовини за результатами експерименту.

Результати досліджень. Досліди проводилися для адсорбенту NaY при двох значеннях температури: 51 та 92°C. В результаті досліджень були отримані ізотерми адсорбції HFC-134a та HFC-134 [1].

На рис. 1 представлені результати перевірки моделі Тота для отриманих експериментальних даних. Значення параметрів для (1) були отримані шляхом мінімізації відносного квадратичного відхилення (6). Для даного випадку $n^0=3,8$; $1/K_1^*=5,47$; $m=0,57$; середнє $\Delta=0,004$.

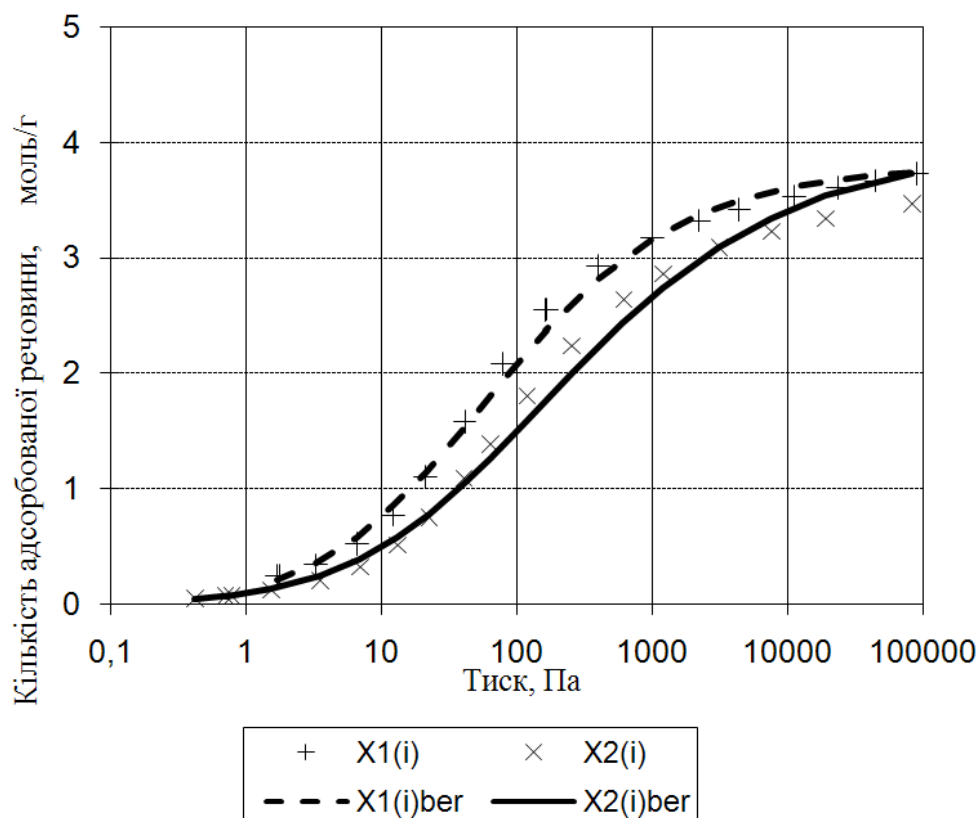


Рис. 1 – Ізотерми адсорбції HFC-134 та HFC-134a на NaY при $T=51^{\circ}\text{C}$:
 $X1(i)$, $X2(i)$ – експериментальні дані для HFC-134 та HFC-134a відповідно;
 $X1(i)_{\text{ber}}$, $X2(i)_{\text{ber}}$ – дані, отримані за рівнянням Тота

Висновки. Були проведені експерименти та отримані ізотерми адсорбції ізомерів тетрафторетану HFC-134a та HFC-134 на NaY в різних температурних режимах. Отримані ізотерми показують, що цеоліт NaY може бути застосований для розділення ізомерів тетрафторетану при їх виробництві, оскільки має чітко виражену селективність до HFC-134a. Крім того даний адсорбент може бути використаний в процесах пов'язаних із утилізацією даних фреонів і зменшення їх викидів у атмосферу. Отримані результати можуть бути використані для синтезу систем управління процесами адсорбції як вихідні дані для розробки математичної моделі процесу, а також як складова бази знань про адсорбцію [3]. Була розглянута математична модель Тота процесу адсорбції, показано, що вона добре описує експериментально отримані дані для однокомпонентної адсорбції.

1. Кваско М. З., Жураковська О.С., Жураковський Я.Ю. Дослідження ізотерм адсорбції тетрафторетану на цеоліті NaY. - Рибне господарство України. – 2011. - № 2. – С. 48-52.
2. Mersmann A. Thermische Verfahrenstechnik: Grundlagen und Methoden/ A. Mersmann, M. Kind, J. Stichlmair// Springer Verlag, Berlin, Heidelberg, New York, – 2005. – 644p.
3. Savitz S. Adsorption of Hydrofluorocarbons HFC-134 and HFC-134A on X and Y Zeolites: Effect of Ion-Exchange on Selectivity and Heat of Adsorption/ S. Savitz, F. R. Siperstein, R. Huber, S. M. Tieri, R. J. Gorte, A. L. Myers, C. P. Grey, D. R. Corbin// J. Phys. Chem. B. – 1999. – Vol. 103. – №39. – P. 8283-8289.